

## Modélisation cinétique de la combustion de toxiques chimiques

**Intitulé du poste :** Chercheur en cinétique chimique

### Informations générales :

Chercheur postdoctoral au Laboratoire Réactions et Génie des Procédés à Nancy.

Date de publication de l'offre : novembre 2022

Date de démarrage : 1<sup>er</sup> février 2023

Durée du contrat : 24 mois

Rémunération : 2850 € (brut)

Niveau d'étude : doctorat

### Mission :

Les données physico-chimiques comme les mécanismes de dégradation des agents chimiques toxiques, des molécules modèles qui servent à leur étude (simulants) et des toxiques industriels restent mal connus. Ces grandeurs sont pourtant indispensables pour évaluer l'impact d'une émission atmosphérique de ces produits, dimensionner des procédés d'élimination de stocks ou prédire leur évolution s'ils sont soumis à une élévation de température ou de pression comme lors d'un incendie ou d'explosion.

En collaboration avec le Centre d'Etudes du Bouchet de la Délégation Générale pour l'Armement (DGA), ce projet vise à élaborer des modèles cinétiques détaillés prédictifs de la combustion d'un certain nombre d'agents chimiques toxiques tels que des dérivés organophosphorés et halogénés. Le travail s'articule autour de l'étude des voies réactionnelles, des constantes de vitesses et des données thermodynamiques des espèces chimiques. L'absence de données dans la littérature et les difficultés expérimentales liées à la nature des molécules nécessitent l'utilisation des outils de la chimie théorique (calculs *ab initio*). L'objectif de l'étude porte sur le développement de modèles cinétiques prédictifs de la décomposition de nouveaux composés et sur l'amélioration des bases de réactions des produits de décomposition, en s'appuyant sur des résultats expérimentaux.

### Activités:

Une première partie sera dédiée au développement d'un modèle cinétique détaillé prédictif de la décomposition thermique et de la combustion de plusieurs agents chimiques spécifiques. Les modèles seront construits de manière systématique en prenant en compte les réactions moléculaires et radicalaires. Les calculs théoriques seront utilisés pour l'analyse des voies réactionnelles et l'évaluation des grandeurs thermodynamiques et cinétiques.

Un deuxième volet consistera en la réévaluation et l'amélioration des bases de réactions en phase gazeuse des petits produits phosphorés produits par la décomposition des agents. Ces bases communes aux mécanismes de décomposition des différents produits étudiés seront validées grâce aux données de la littérature et à de nouvelles mesures expérimentales obtenues avec des espèces phosphorées

légères. Ces bases sont également importantes pour la simulation des effets d'inhibition de combustion des organophosphorés employés comme agent retardateurs de flamme dans de nombreux matériaux.

**Compétences attendues:**

Le candidat, titulaire d'un doctorat, aura une expérience de recherche en chimie physique, cinétique chimique et en modélisation de systèmes réactifs. Des compétences dans le domaine du calcul *ab initio* seront appréciées.

**Contexte du travail :**

Basé en Lorraine, le Laboratoire de Réactions et Génie des Procédés (LRGP) est une Unité Mixte de Recherche du CNRS et de l'Université de Lorraine. Il est situé à Nancy en Meurthe-et-Moselle. Il est principalement situé dans le centre-ville, dans les locaux de l'École Nationale des Industries Chimiques de Nancy (ENSIC). Le Groupe de Cinétique Radicalaire fait partie du laboratoire et possède une expertise reconnue en cinétique chimique.

**Supplementary information:**

Date limite de réception des candidatures : 1<sup>er</sup> décembre 2022

Documents requis: CV, incluant la liste des publications, lettre de motivation et deux références (personnes susceptibles d'être contactées)

**Contacts :** P.A. Glaude (DR CNRS), pierre-alexandre.glaude@univ-lorraine.fr  
R. Fournet (Professeur UL), rene.fournet@univ-lorraine.fr  
B. Sirjean (CR CNRS), baptiste.sirjean@univ-lorraine.fr